

ẢNH HƯỞNG CỦA ÁP SUẤT ĐẾN HỆ SỐ DEBYE - WALLER, TẦN SỐ DEBYE, NHIỆT ĐỘ DEBYE VÀ NHIỆT ĐỘ NÓNG CHẢY CỦA KIM LOẠI CADMIUM CẤU TRÚC HCP

Nguyễn Thị Hồng¹, Nguyễn Hoàng Đạt², Lê Hồ Hải Yến², Trịnh Bá Hưng²,
Trịnh Thị Huyền³, Bùi Cao Nam³, Trần Thị Hoàng⁴

TÓM TẮT

Trong bài báo này, chúng tôi sử dụng phương pháp bán thực nghiệm để nghiên cứu một số tính chất nhiệt động của kim loại cadmium (Cd) bao gồm tần số và nhiệt độ Debye, DWF. Mô hình Debye phi điều hòa và định luật nóng chảy Lindemann được chúng tôi kết hợp để nghiên cứu nhiệt độ nóng chảy của kim loại Cd. Các tính toán số đã được thực hiện cho kim loại Cd lên đến 50 GPa. Kết quả tính toán cho thấy, DWF của Cd tăng nhanh theo nhiệt độ nhưng lại giảm khi áp suất tăng. Trong khi đó, giá trị tần số Debye, nhiệt độ Debye và nhiệt độ nóng chảy của Cd tăng đáng kể theo áp suất và có xu hướng ổn định hơn ở áp suất cao. Kết quả tính toán chúng tôi thu được có sự phù hợp tốt với một số kết quả lý thuyết và thực nghiệm trước đây. Nghiên cứu này không chỉ cung cấp thêm cơ sở dữ liệu về các tính chất nhiệt động của Cd mà còn mang lại nhiều ứng dụng thực tiễn trong các lĩnh vực khoa học và công nghiệp.

Từ khóa: Cadmium, mô hình Debye phi điều hòa, tần số và nhiệt độ Debye, hệ số Debye-Waller, nóng chảy, áp suất cao, định luật nóng chảy Lindemann.

DOI: <https://doi.org/10.70117/hdujs.79.09.2025.771>

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Cadmium là một nguyên tố hóa học mềm, dễ uốn và ổn định (không dễ dàng hoặc tự phát phản ứng với các nguyên tố khác), được tìm thấy trong vỏ Trái Đất với hàm lượng nhỏ. Ở điều kiện môi trường, Cd có cấu trúc lục giác xếp chặt (HCP) [1], được sử dụng trong các loại pin (đặc biệt là pin Ni-Cd), lớp sơn phủ, mạ kim loại, làm chất ổn định cho plastic, có thể dùng làm lưới kiểm soát trong các lò phản ứng hạt nhân. Các hợp chất chứa Cd được sử dụng trong một số vật liệu bán dẫn như cadmium sulfide, cadmium selenide, trong nhựa PVC làm chất ổn định, trong thiết bị phát hiện neutrino đầu tiên. Bên cạnh đó, Cd là một kim loại nặng độc hại, và việc hiểu rõ tính chất nhiệt động học của nó giúp xác định các điều kiện an toàn khi xử lý và lưu trữ, giảm nguy cơ tiếp xúc với Cd và các vấn đề sức khỏe liên quan, phát triển các phương pháp xử lý chất thải hiệu quả và an toàn. Do đó, các tính chất nhiệt động của kim loại này được quan tâm đáng kể trong nhiều thập kỷ, không chỉ từ quan điểm cơ bản mà còn cho các ứng dụng công nghệ [2-9]. Mặc dù đã có nhiều công trình nghiên cứu tính chất nhiệt động của kim loại Cd được thực hiện, nhưng các nghiên cứu chủ yếu là trong khoảng áp suất thấp [2][6]. Ở vùng nhiệt độ và áp suất cao, các kết quả tính toán còn chưa phù hợp tốt với thực nghiệm, giữa các kết quả của các nghiên cứu khác nhau vẫn chưa thống nhất [9]. Các công trình nghiên cứu về hệ số Debye - Waller của Cd ở áp suất cao còn rất hạn chế.

¹Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Hồng Đức; Email: nguyenthongvatly@hdu.edu.vn

²Lớp K25 ĐHSP Vật lý, Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Hồng Đức

³Khoa Kỹ thuật, Công nghệ và Truyền thông, Trường Đại học Hồng Đức

⁴Lớp K26 ĐHSP KHTN, Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Hồng Đức

Trong nghiên cứu này, sự phụ thuộc áp suất của tần số Debye, nhiệt độ Debye, DWF và nhiệt độ nóng chảy của kim loại Cd cấu trúc HCP được phân tích dựa trên việc phát triển mô hình Debye phi điều hòa (Anharmonic correlated Debye model - ACDM) kết hợp với một số dữ liệu và định luật thực nghiệm. Kết quả của nghiên cứu không chỉ có giá trị về mặt lý thuyết, mà còn cung cấp thêm cơ sở dữ liệu về các tính chất nhiệt động của vật liệu này, từ đó có thể mở rộng nghiên cứu cho một số kim loại và hợp kim khác, cũng như mang lại nhiều ứng dụng thực tiễn trong các lĩnh vực khoa học và công nghiệp.

2. NỘI DUNG VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

2.1. Hệ số Debye - Waller. Tần số và nhiệt độ Debye

Khi chiếu chùm tia X vào tinh thể, ta thu được cấu trúc tinh thể phổ hấp thụ tia X mở rộng (Extended X-ray Absorption Fine Structure - EXAFS) là kết quả giao thoa của sóng quang điện tử đến và sóng quang điện tử tán xạ [10]. EXAFS là một trong những phương pháp nghiên cứu tính chất nhiệt động của tinh thể một cách hiệu quả. Tuy nhiên, do sự dao động nhiệt của các nguyên tử trong mạng tinh thể mà phổ EXAFS thu được cũng sẽ bị ảnh hưởng. Để giải quyết vấn đề này, người ta đã đề xuất phương pháp khai triển gần đúng các mômen của sự dịch chuyển nguyên tử được gọi là các cumulant EXAFS [10].

$$\langle e^{2iqr} \rangle = \exp \left[2iqr_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2iq)^n}{n!} \sigma^{(n)} \right], \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1)$$

trong đó, r_0 là khoảng cách giữa hai nguyên tử ở vị trí cân bằng, $\sigma^{(n)}$ là các cumulant bậc n . Cumulant bậc hai $\sigma^{(2)}$ mô tả phương sai của phân bố khoảng cách, tương ứng với độ dịch chuyển tương đối bình phương trung bình song song đặc trưng cho DWF hay hệ số tắt dần của phổ EXAFS nên cũng được gọi là DWF. Trong ACDM, DWF được xác định bởi [11]

$$\sigma^{(2)} = \left\langle \left(r - r_0 - \sigma^{(1)} \right)^2 \right\rangle = -\sigma_0^2 \int_0^{\pi/a} \omega(q) \frac{1+Z(q)}{1-Z(q)} dq, \quad (2)$$

trong đó, $\sigma_0^2 = \frac{\hbar a}{2\pi k_{eff}}$ là đóng góp dao động điểm không vào cumulant bậc hai, tần

số dao động phonon $\omega(q)$, hằng số lực hiệu dụng k_{eff} và $z(q)$ có dạng:

$$\omega(q) = 2\sqrt{\frac{k_{eff}}{M}} \left| \sin\left(\frac{qa_h}{2}\right) \right|, \quad k_{eff} = \frac{M\omega_D^2}{4}, \quad z(q) = \exp(\beta\hbar\omega(q)), \quad \beta = \frac{1}{k_B T}, \quad (3)$$

với q là số sóng, $|q| \leq \frac{\pi}{a_h}$, M là tổng khối lượng của hệ, a_h là hằng số mạng.

Mối liên hệ giữa hằng số mạng a_h và thể tích V của tinh thể được cho bởi:

$$a_h = a_{0h} (V/V_0)^{1/3} = a_{0h} (\eta)^{1/3}, \quad \eta = \frac{V}{V_0},$$

trong đó a_{0h} là giá trị hằng số mạng của kim loại ở áp suất $P = 0$. V_0 là thể tích của tinh thể ở điều kiện môi trường, $\eta = \frac{V}{V_0}$ là hệ số nén thể tích tinh thể.

Tần số dao động phonon ω thay đổi phụ thuộc vào thể tích có nguyên nhân từ hiệu ứng phi điều hoà mạng tinh thể. Mối liên hệ này được biểu thị bởi hệ số Grüneisen γ_G như sau [12].

$$\gamma_G = -\frac{\partial \ln \omega}{\partial \ln V}. \quad (4)$$

Nhiều đề xuất đã được đưa ra để mô tả ảnh hưởng của áp suất lên hệ số Grüneisen [13] [14]. Ở đây, chúng tôi sẽ áp dụng đề xuất của Burakovsky và cộng sự về hệ số Grüneisen [15].

$$\gamma_G = \frac{1}{2} + \gamma_1 \eta^{1/3} + \gamma_2 \eta^s, \quad (5)$$

trong đó $\gamma_1, \gamma_2, s > 1$ là các thành phần phụ thuộc vào vật liệu nghiên cứu. Thực hiện một số biến đổi toán học dựa trên các biểu thức (4) và (5) chúng tôi suy ra:

$$\omega_D(\eta) = \omega_{0D} \eta^{-1/2} \exp \left[-3\gamma_1 (\eta^{1/3} - 1) - \frac{\gamma_2}{s} (\eta^s - 1) \right], \quad (6)$$

$$\theta_D(\eta) = \theta_{0D} \eta^{-1/2} \exp \left[-3\gamma_1 (\eta^{1/3} - 1) - \frac{\gamma_2}{s} (\eta^s - 1) \right], \quad (7)$$

$$\text{trong đó: } \omega_{0D} = 2\sqrt{\frac{k_{eff}^0}{M}}, \quad \theta_{0D} = \frac{\hbar \omega_{0D}}{k_B}, \quad (8)$$

tương ứng là tần số và nhiệt độ Debye ở áp suất không. Sử dụng kết quả này, chúng tôi thu được biểu thức của hằng số lực hiệu dụng k_{eff} phụ thuộc vào thể tích dưới dạng:

$$k_{eff} = k_{eff}^0 \eta^{-1} \exp \left[-6\gamma_1 (\eta^{1/3} - 1) - \frac{2\gamma_2}{s} (\eta^s - 1) \right], \quad (9)$$

với k_{eff}^0 là hằng số lực hiệu dụng tại áp suất không.

Các tương tác lân cận gần nhất giữa các nguyên tử hấp thụ (A) hay tán xạ ngược (B) và các lân cận gần nhất của chúng được mô tả bởi một thể hiệu dụng phi điều hoà

$$E(r) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \varphi(r_{ij}) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\infty} z_k \varphi(v(k)a). \text{ Trong } \Lambda\text{CDM, thể tương tác này có dạng [16].}$$

$$V_{eff}(x) = \varphi(x) + \sum_{j \neq i} \varphi \left(\frac{\mu}{M_i} x \hat{R}_{AB} \hat{R}_{ij} \right) = \frac{1}{2} k_{eff} x^2 + k_3 x^3 + k_4 x^4 + \dots, \quad (10)$$

trong đó $\varphi(x)$ mô tả thể năng tương tác giữa các nguyên tử A và B; số hạng

$$\sum_{j \neq i} \varphi \left(\frac{\mu}{M_i} x \hat{R}_{AB} \hat{R}_{ij} \right) \text{ mô tả tương tác giữa các nguyên tử lân cận gần nhất với nguyên tử A và}$$

B; $i = A$ (đối với nguyên tử A) và $i = B$ (đối với nguyên tử B); j lấy trên tất cả các nguyên tử

lân cận gần nhất ($j \neq A, B$); $\hat{R}_{AB}$ là véctơ đơn vị hướng từ nguyên tử A đến B; $\hat{R}_{ij}$ là véctơ đơn vị hướng từ nguyên tử thứ i đến nguyên tử thứ j ; M_A và M_B tương ứng là khối lượng của các nguyên tử A và B; $\mu = \frac{M_A M_B}{M_A + M_B}$ là khối lượng rút gọn của hệ nguyên tử A và B; k_{eff} là

hằng số lực liên kết hiệu dụng; k_3 và k_4 là hằng số lực phi điều hoà bậc ba và bậc bốn gây ra từ sự bất đối xứng của hàm phân bố do đóng góp của hiệu ứng phi điều hoà ở nhiệt độ cao.

Thế hiệu dụng phi điều hoà cho tinh thể kim loại cấu trúc HCP được xác định bằng mô hình ACDM. Ở áp suất $P = 0$, biểu thức thế năng hiệu dụng $V_{eff}(x)$ ở (10) được xác định là:

$$V_{eff}(x) = V(x) + 8V\left(\frac{x}{4}\right) + 4V\left(-\frac{x}{4}\right) + 4V\left(-\frac{5x}{12}\right) + 2V\left(-\frac{x}{6}\right), \quad (11)$$

ở đây, giả sử thế tương tác giữa các nguyên tử A (và B) với các nguyên tử lân cận có thể được mô tả bởi thế tương tác cặp Morse và trong gần đúng khai triển bậc 4 của độ dời $x = r - r_0$, thế tương tác này có dạng:

$$V(r) = D \left[e^{-2\alpha(r-r_0)} - 2e^{-\alpha(r-r_0)} \right] \approx D \left(-1 + \alpha^2 x^2 - \alpha^3 x^3 + \frac{7}{12} \alpha^4 x^4 + \dots \right), \quad (12)$$

trong đó, D là năng lượng phân ly, α mô tả độ rộng của thế năng.

Thay (12) vào (11) chúng tôi thu được

$$V_{eff}(x) \approx D \left(-19 + \frac{5}{2} \alpha^2 x^2 - \frac{55}{72} \alpha^3 x^3 + \frac{3535}{5184} \alpha^4 x^4 \right). \quad (13)$$

So sánh (13) với (10), xác định được hằng số lực đàn hồi $k_{eff} = 5D\alpha^2$. Từ đó, suy ra tần số Debye ω_D và nhiệt độ Debye θ_D của tinh thể HCP theo (8).

2.2. Nhiệt độ nóng chảy

Phần này trình bày cách tiếp cận bài toán nóng chảy của vật liệu ở áp suất cao dựa trên sự kết hợp mô hình Debye phi điều hoà với điều kiện nóng chảy Lindemann, được xây dựng như sau [17]: Quá trình nóng chảy của vật liệu sẽ bắt đầu diễn ra khi tỉ số giữa căn bậc hai của độ dịch chuyển bình phương trung bình $\langle u^2 \rangle$ và khoảng cách lân cận gần nhất giữa các nguyên tử $a(P, T)$ tiến đến một giá trị tới hạn (hay giá trị ngưỡng) [18]. Wang và cộng sự [19] cũng đã chứng minh rằng điều kiện này tương đương với công thức sau:

$$T_m = \text{const} \cdot V^{2/3} \cdot \theta_D^2 \quad (14)$$

Thực hiện các phép biến đổi toán học trên các biểu thức (5) và (17) thu được:

$$T_m = T_0 \eta^{-1/3} \exp \left\{ 6\gamma_1 (1 - \eta^{1/3}) + \frac{2\gamma_2}{s} (1 - \eta^s) \right\} \quad (15)$$

trong đó T_0 là nhiệt độ nóng chảy của vật liệu ở điều kiện môi trường.

Các biểu thức thu được ở trên của các đại lượng nhiệt động là các biểu thức phụ thuộc vào thể tích. Để xác định được ảnh hưởng của áp suất đến các đại lượng này, chúng tôi sử dụng phương trình Vinet có dạng sau [20]

$$P = 3K_0\eta^{-2/3}(1-\eta^{1/3})\exp\left[\frac{3}{2}(K'_0-1)(1-\eta^{1/3})\right], \quad (16)$$

với, K_0 , K'_0 là các môđun nén khối đẳng nhiệt và đạo hàm bậc nhất theo áp suất của nó.

3. KẾT QUẢ NGHIÊN CỨU VÀ THẢO LUẬN

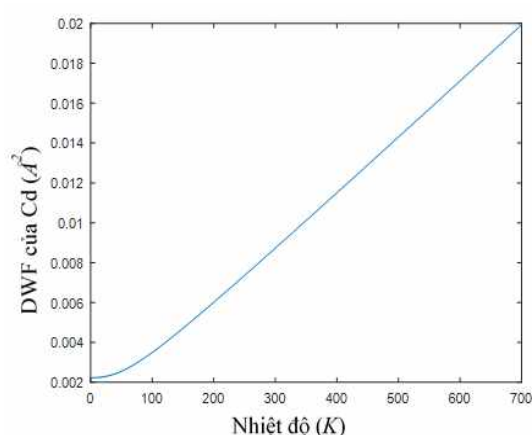
Để thảo luận về hiệu quả của mô hình lý thuyết hiện tại trong việc tính toán và phân tích dao động EXAFS phụ thuộc áp suất của kim loại Cd, chúng tôi sử dụng các biểu thức thu được từ Phần 2, trong đó, các tham số thể Morse được lấy từ công trình thực nghiệm [21] $\alpha = 1,9053 \text{ (}\text{\AA}^{-1}\text{)}$, $D_0 = 0,1653 \text{ (eV)}$, $a = 2,98 \text{ (}\text{\AA}\text{)}$. Các tham số $\gamma_1 = 1,18$, $\gamma_2 = 0,97$, $s = 4,7$ và $T_0 = 594,2$ [15]. Môđun khối đẳng nhiệt $K_0 = 42$ và đạo hàm bậc nhất theo áp suất của nó $K'_0 = 6,5$ [22]. Trong nghiên cứu này, sự phụ thuộc áp suất của các đại lượng nhiệt động được tính toán ở áp suất lên đến 50 GPa. Lựa chọn này được thúc đẩy bởi thực tế rằng các thí nghiệm nhiễu xạ bột tia X áp suất cao trên Cd cho thấy kim loại Cd ổn định ở cấu trúc HCP trong khoảng áp suất này.

Áp dụng mô hình lý thuyết đưa ra ở Phần 2, chúng tôi tính toán được hằng số lực hiệu dụng, tần số Debye và nhiệt độ Debye ở áp suất không và nhiệt độ môi trường của Cd tương ứng được chỉ ra ở Bảng 1.

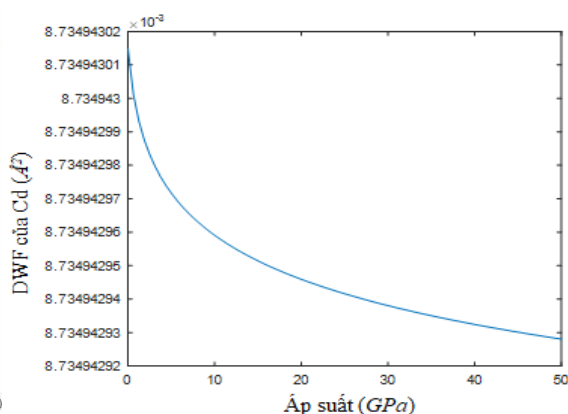
Bảng 1. Hằng số lực hiệu dụng k_{eff} , tần số Debye ω_D và nhiệt độ Debye k_{eff} , θ_D và nhiệt độ Debye thực nghiệm θ_D^{exp} của các kim loại Cd

Kim loại	$k_{eff} \text{ (eV/\AA}^2\text{)}$	$\omega_D \text{ (}\times 10^{13} \text{ Hz)}$	$\theta_D \text{ (K)}$	$\theta_D^{exp} \text{ (K)}$
Cd	3.0454	3.2357	247,2271	244.447 [4], [21]; 204 ± 3 [23] $219,5 \pm 2,7$ [24]; 213 ± 1 [25]

Hình 1 biểu diễn sự phụ thuộc nhiệt độ của DWF của kim loại Cd. Kết quả tính toán trên hình 1 cho thấy, DWF của kim loại Cd tăng nhanh theo nhiệt độ. Cụ thể, khi tăng nhiệt độ từ 0 K đến 700 K, DWF tăng từ khoảng 0,00223 ($\text{\AA}^2$) đến 0.01993 ($\text{\AA}^2$). Sự gia tăng này có thể được giải thích dựa trên bản chất của dao động mạng tinh thể. Khi nhiệt độ tăng, năng lượng dao động của các nguyên tử trong mạng tinh thể cũng tăng, làm giảm sự ổn định của chúng tại vị trí cân bằng, độ dịch chuyển trung bình so với vị trí cân bằng tăng. Điều này dẫn đến sự gia tăng hệ số Debye-Waller. Hình 1 cũng cho thấy, ở khoảng nhiệt độ thấp (khoảng dưới 200 K), DWF tăng chậm, trong khoảng nhiệt độ cao hơn, DWF tăng gần như tuyến tính theo sự tăng của áp suất. Điều này chứng tỏ ở vùng nhiệt độ cao, ảnh hưởng của yếu tố phi điều hòa đến dao động mạng tinh thể là đáng kể.



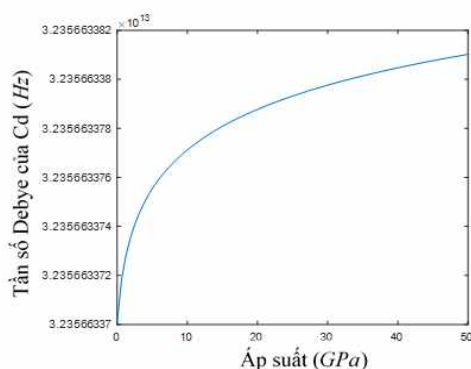
Hình 1. Hệ số Debye - Waller của kim loại Cd dưới ảnh hưởng của nhiệt độ



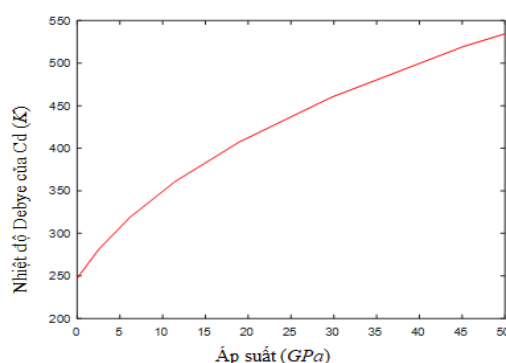
Hình 2. Hệ số Debye - Waller của kim loại Cd dưới ảnh hưởng của của áp suất

Hình 2 biểu diễn sự phụ thuộc áp suất của DWF của kim loại Cd ở nhiệt độ phòng đến 50 GPa. Kết quả tính toán cho thấy DWF của kim loại Cd giảm khi áp suất tăng. Ở áp suất 0 GPa giá trị của DWF của Cd vào khoảng 0.008735 ($\text{\AA}^2$). Sự giảm của DWF này tương ứng là sự giảm đáng kể của biên độ EXAFS. Hiện tượng quan sát được có thể được giải thích bằng các dao động giới hạn của các nguyên tử dưới áp suất tăng, dẫn đến sự giảm độ dịch chuyển tương đối bình phương trung bình hoặc DWF giữa hai nguyên tử trung gian. Mặc dù sự thay đổi không quá lớn về mặt giá trị tuyệt đối nhưng xu hướng giảm rõ ràng cho thấy ảnh hưởng của áp suất lên dao động nguyên tử là đáng kể.

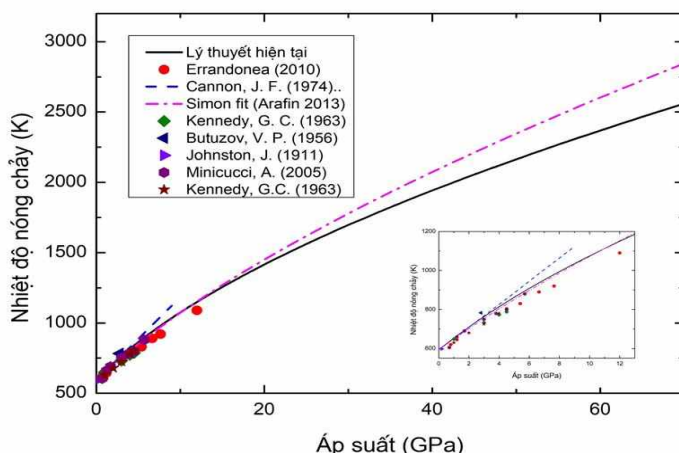
Hình 3 và Hình 4 biểu diễn sự phụ thuộc áp suất của tần số và nhiệt độ Debye của kim loại Cd đến 50 GPa. Kết quả tính toán trên Hình 3 và Hình 4 cho thấy tần số và nhiệt độ Debye của kim loại Cd tăng theo áp suất. Trong khoảng áp suất dưới 10 GPa, đồ thị cho thấy tần số và nhiệt độ Debye tăng nhanh, gần như tuyến tính theo áp suất. Tuy nhiên, ở khoảng áp suất lớn hơn 10 GPa thì độ dốc của đồ thị giảm dần. Thực tế này có thể được giải thích rằng khi áp suất tăng, các nguyên tử trong mạng tinh thể bị nén, làm giảm khoảng cách liên nguyên tử. Khi đó, lực hồi phục (liên kết giữa các nguyên tử) tăng lên, dẫn đến tần số dao động của các nguyên tử tăng, kéo theo sự tăng lên của nhiệt độ Debye.



Hình 3. Tần số Debye của kim loại Cd dưới ảnh hưởng của áp suất



Hình 4. Nhiệt độ Debye của kim loại Cd dưới ảnh hưởng của áp suất



Hình 5. Nhiệt độ nóng chảy của kim loại Cd dưới ảnh hưởng của áp suất

Hình 5 là đồ thị nhiệt độ nóng chảy của kim loại Cd dưới ảnh hưởng của áp suất đến 70 GPa (đường liền nét). Một số dữ liệu thực nghiệm và lý thuyết trước đây cũng đã được đưa vào để so sánh. Đồ thị cho thấy, nhiệt độ nóng chảy của Cd tăng khi áp suất tăng. Điều này phù hợp với thực tế rằng khi áp suất tăng, lực liên kết giữa các nguyên tử tăng, khiến vật liệu khó nóng chảy hơn. Ở vùng áp suất thấp (0–10 GPa), nhiệt độ nóng chảy tăng gần như là tuyến tính theo áp suất, với tốc độ tăng của nhiệt độ nóng chảy vào khoảng $dT_m / dP = 40 \text{ K / GPa}$. Ở vùng áp suất cao hơn (60–70 GPa), tốc độ gia tăng nhiệt độ nóng chảy bắt đầu giảm $dT_m / dP = 30 \text{ K / GPa}$. Đường cong nhiệt độ nóng chảy phù hợp tốt với các điểm thực nghiệm của các công trình được đưa ra so sánh và nghiên cứu lý thuyết của Arafin [26] và gần với các điểm thực nghiệm hơn so với nghiên cứu của Cannon [2] ở khoảng áp suất nhỏ hơn 18 GPa. Ở áp suất lớn hơn, kết quả trên Hình 5 cho thấy đường cong nóng chảy theo lý thuyết thấp hơn và có xu hướng gần với thực nghiệm hơn so với các nghiên cứu lý thuyết trước đó của Arafin và Cannon [2][26].

Sự chênh lệch giữa các kết quả của chúng tôi so với các giá trị thực nghiệm được đưa ra để so sánh nằm trong khoảng 0,7% đến 8,33%. Nguyên nhân dẫn đến sự khác biệt trên có thể do một số yếu tố như hạn chế của điều kiện nóng chảy Lindemann, hoặc có thể ở vùng áp suất cao hơn, tính toán của chúng tôi bị hạn chế bởi giới hạn gần đúng. Tuy nhiên, với độ chênh lệch so với thực nghiệm thấp hơn so với một số nghiên cứu lý thuyết khác, chúng tôi tin rằng nghiên cứu này đóng góp đáng kể vào cơ sở dữ liệu về nhiệt độ nóng chảy của kim loại Cd trong điều kiện áp suất cao.

3. KẾT LUẬN

Trong bài báo này, ảnh hưởng của áp suất lên các đại lượng nhiệt động như tần số Debye, nhiệt độ Debye, DWF và nhiệt độ nóng chảy của kim loại Cd đã được chúng tôi nghiên cứu dựa trên ACDM kết hợp định luật nóng chảy Lindemann. Các kết quả tính toán

cho thấy DWF của Cd tăng nhanh theo nhiệt độ nhưng lại giảm khi áp suất tăng. Điều này chỉ ra rằng dao động nhiệt của nguyên tử trong mạng tinh thể Cd bị hạn chế ở áp suất cao, tức là sự gia tăng độ cứng của mạng tinh thể khi chịu nén. Giá trị tần số Debye, nhiệt độ Debye và nhiệt độ nóng chảy của Cd tăng đáng kể theo áp suất và có xu hướng ổn định hơn ở áp suất cao. Các kết quả của chúng tôi được xác định từ ACDM phù hợp khá tốt với giá trị thực nghiệm thu thập được cho thấy rằng lý thuyết mà chúng tôi xây dựng không chỉ góp phần làm rõ các đặc tính vật lý của kim loại Cd mà còn có thể mở rộng nghiên cứu cho một số kim loại và hợp kim khác góp phần mang lại nhiều ứng dụng thực tiễn trong các lĩnh vực khoa học và công nghệ vật liệu.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] P. D. Pathak et al. (1980), *Thermal properties of some H. C. P. metals*, Physica Status Solidi (a), vol.62, 625-629.
- [2] J. F. Cannon (1974), *Behavior of the elements at high pressures*, J. Phys. Chern. Ref. Data, vol.3, 781-824.
- [3] T. S. Tien (2022), *Analysis of Temperature-dependent Extended X-ray Absorption Fine Structure Oscillation of Distorted Crystalline Cadmium*, Commun. Phys., vol.32, 401-412.
- [4] N. V. Hung et al. (2014), *High-order expanded XAFS Debye Waller factors of HCP crystals based on classical anharmonic correlated Einstein model*, Mod. Phys. Letters B, vol.28, p.1450174-1-1450174-9.
- [5] B. Li et al.(2018), *Phase transition and thermoelastic behavior of cadmium sulfide at high pressure and high temperature*, J. Alloys Compd., vol.743, 419-427.
- [6] B. P. Grady et al. (1996), *EXAFS Studies of Various Sulfonated and Carboxylated Cadmium Ionomers*, Am. Chem. Soc., vol.29, 1685-1690.
- [7] I. F. Vasconcelos et al. (2008), *EXAFS analysis of cadmium(II) adsorption to kaolinite Igor*, Chem. Geol., vol.249, 237-249.
- [8] M. Minicucci et al. (2005), *Cadmium under High Pressure and High Temperature Conditions*, Phys. Scripta., vol.T115, 1056-1058.
- [9] D. Errandonea (2010), *The melting curve of ten metals up to 12 GPa and 1600 K*, J. Appl. Phys., vol.108, p.033517-1 - 033517-10.
- [10] G. Bunker (1983), *Application of the ratio method of EXAFS analysis to disordered systems*, Nucl. Instruments Methods Phys. Res., vol.207, 437-444.
- [11] N. Van Hung et al. (2010), *Anharmonic correlated Debye model Debye-Waller factors*, Phys. B Condens. Matter, vol.405, 2519-2525.
- [12] E. Grüneisen (1912), *Theorie des festen Zustandes einatomiger Elemente*, Ann. Phys., vol.344, 257-306.
- [13] J. C. Graf et al. (2004), *High-Pressure Debye-Waller and Grüneisen Parameters of Gold and Copper*, Proceedings of the Conference of the American Physical Society Topical Group on Shock Compression of Condensed Matter - Portland, Oregon

- (USA) (20-25 July 2003), vol.65, 65-68.
- [14] H. K. Hieu (2014), *Melting of solids under high pressure*, Vacuum, vol.109, 184-186.
- [15] L. Burakovsky et al. (2004), *Analytic model of the Grüneisen parameter all densities*, J. Phys. Chem. Solids, vol.65, 1581-1587.
- [16] N. V. Hung et al. (1997), *Anharmonic correlated Einstein-model Debye-Waller factors*, Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys., vol.56, 43-46.
- [17] L. Burakovsky et al. (2000), *Analysis of dislocation mechanism for melting of elements: Pressure dependence*, J. Appl. Phys., vol.88, 6294-6310.
- [18] F. Lindemann (1910), *The calculation of molecular vibration frequencies*, Phys. Z, vol.11, 609-612.
- [19] Y. Wang et al. (2001), *Melting of iron and other metals at earth's core conditions: A simplified computational approach*, Phys. Rev. B, vol.65, 1-3.
- [20] P. Vinet et al. (1987), *Compressibility of solids*, J. Geophys. Res. Geophys Res, vol.92, 9319-9325.
- [21] N V. Hung et al. (2008), *Anharmonic effective potential, Local force constant and EXAFS of crystal: Theory and comparison to experiment*, Int. J. Mod. Phys. B, vol.22, 5155-5156.
- [22] T. Kenichi (1997), *Structural study of Zn and Cd to ultrahigh pressures*, Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics, 56(9), 5170-5179.
- [23] D. L. Martin (1961), *The Specific Heat of Hexagonal Metals at Very Low Temperatures*, Proc. Phys. Soc., vol.78, 1482-1488.
- [24] D. Rajdev et al. (1962), *Debye Temperature for Cadmium Derived from Low-Temperature Specific-Heat Measurements*, Phys. Rev., vol.128, 1030-1032.
- [25] C. W. Garland et al. (1960), *Elastic Constants of Cadmium from 4.2°K to 300°K*, Physical Review, vol.119, 1218-1222.
- [26] S. Arafin et al. (2013), *Melting of metals under pressure*, Physica B: Condensed Matter, vol.419, 40-44.

EFFECT OF PRESSURE ON DEBYE - WALLER FACTOR, DEBYE FREQUENCY, DEBYE TEMPERATURE AND MELTING TEMPERATURE OF HCP STRUCTURE CADMIUM METAL

**Nguyen Thi Hong, Nguyen Hoang Dat, Le Ho Hai Yen, Trinh Ba Hung, Trinh Thi Huyen,
Bui Cao Nam, Tran Thi Hoang**

ABSTRACT

Cadmium (Cd) has a great potential for application in the technology of manufacturing super-strong or heat-resistant alloys. The study of the thermodynamic properties of this metal is necessary not only in the scientific field but also in many industries. However, the study of some thermodynamic quantities of Cd such as Debye frequency and temperature, Debye - Waller factor (DWF) at high pressure is still limited. In this paper, we use a semi-empirical method to study some thermodynamic properties of Cd

metal including Debye frequency and temperature, DWF. The anharmonic Debye model and the Lindemann's melting law are combined to study the melting temperature of Cd metal. Numerical calculations have been performed for Cd metal up to 50 GPa. The calculated results show that the DWF of Cd increases rapidly with temperature but decreases with increasing pressure. Meanwhile, the Debye frequency, Debye temperature and melting temperature of Cd increase significantly with pressure and tend to be more stable at high pressure. This study not only provides additional data on the thermodynamic properties of Cd but also brings about many practical applications in scientific and industrial fields.

Keywords: Cadmium, anharmonic Debye model, Debye frequency and temperature, Debye-Waller factor, melting, high pressure, Lindemann's melting law.

* Ngày nộp bài: 15/3/2025; Ngày gửi phản biện: 17/3/2025; Ngày duyệt đăng: 25/9/2025

* Bài báo là kết quả nghiên cứu từ đề tài NCKH cấp cơ sở (mã số ĐT-2024-03) của Trường Đại học Hồng Đức.